



TITLE:

電子ガスの電媒定数について

AUTHOR(S):

安原, 洋

CITATION:

安原, 洋. 電子ガスの電媒定数について. 物性研究 1973, 19(6): 438-450

ISSUE DATE:

1973-03-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/88607>

RIGHT:

電子ガスの電媒定数について

東北大教養 安 原 洋

(2月9日受理)

§ 1 序

金属中の伝導電子間の相関効果の研究には電媒定数の知識が重要である。本稿では RPA はじめいろいろな形の電媒定数が提案されているがこれらを簡単に整理批判した後, small momentum transfer interaction では RPA, large momentum transfer interaction では antiparallel spin をもつ電子間の ladder interaction を考慮するよう interpolation を行なって金属電子密度での短距離相関を取り入れた電媒定数の形を提案する。

§ 2 Hartree-Fock 近似での polarization

電媒定数 (或いは proper polarization) の計算としては lowest order 近似の RPA に対する電子間の correlation, exchange 効果を取り入れたものとして主に次にあげる形が提案されている。

i) 2nd order exchange および higher order electron-hole ladder ダイアグラムを近似的に取りこんだ Hubbard 近似¹⁾

ii) Kleinman²⁾, Langreth³⁾らによる Hubbard 近似の改良形

iii) Geldart-Taylor⁴⁾らによる HF 近似の static な電媒定数

iv) Time Green's Function を decouple する方法を用いた Toigs-Woodruff⁵⁾らの形。

V) Usui 変換を用いて電子ガスの Hamiltonian を quadratic boson Hamiltonian で近似的に取りあつかった Lam の形⁶⁾。

VI) プラズマ励起の特徴をとらえ individual excitation を平均的スペクトルでおきかえた Lundqvist⁷⁾, Overhauser⁸⁾らによる形。

VII) 電媒定数を pair correlation function の Fourier 変換の汎関数とみなして self-consistent に短距離相関を取り入れる classical な近似法を類推から quantum な場合に応用した Singwi 一派の形 (以後 STLS 理論という)⁹⁾

その他 ω , や \mathbf{q} の特定の値に対する電媒定数の値として, 圧縮率に関連して $\Pi(\mathbf{q} \rightarrow 0, \omega = 0)$, プラズマ減衰に関連して $\epsilon_2(\omega \sim \omega_p, \mathbf{q} \sim 0)$, アルカリ金属のバンド間吸収, one pair and one plasmon 吸収に関連して $\epsilon_2(\omega, \mathbf{G}_{110})$ などの計算があるが本稿ではふれない。(I) ~ (V) までの形は大体の所 Hartree-Fock 近似での proper polarization $\Pi^{\text{HF}}(\mathbf{q}, \omega)$ を近似したものである。electron-hole ladder および HF self-energy をとりこんだ $\Pi^{\text{HF}}(\mathbf{q}, \omega)$ は簡単な計算から次のように考えられる。

$$\Pi^{\text{HF}}(\mathbf{q}, \omega) = - \sum_{\mathbf{p}, \sigma} I(\mathbf{q}, \omega; \mathbf{p}) A(\mathbf{q}, \omega; \mathbf{p}) \quad (2.1)$$

ここで vertex part $A(\mathbf{q}, \omega; \mathbf{p})$ は次の積分方程式を満す。

$$A(\mathbf{q}, \omega; \mathbf{p}) = 1 - \sum_{\mathbf{p}'} v(\mathbf{p} - \mathbf{p}') I(\mathbf{q}, \omega; \mathbf{p}') A(\mathbf{q}, \omega; \mathbf{p}') \quad (2.2)$$

kernel $I(\mathbf{q}, \omega; \mathbf{p})$ は

$$I(\mathbf{q}, \omega; \mathbf{p}) = \frac{(1 - f(\mathbf{p})) f(\mathbf{p} - \mathbf{q})}{\omega - E(\mathbf{p}) + E(\mathbf{p} - \mathbf{q}) + i\eta} - \frac{f(\mathbf{p})(1 - f(\mathbf{p} - \mathbf{q}))}{\omega - E(\mathbf{p}) + E(\mathbf{p} - \mathbf{q}) - i\eta}$$

安原 洋

$$\eta \rightarrow +0$$

(2.3)

$v(\mathbf{q})$, $E(\mathbf{p})$ は各々

$$v(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{q^2}$$

$$E(\mathbf{p}) = \epsilon_{\mathbf{p}} - \sum_{\mathbf{p}'} v(\mathbf{p} - \mathbf{p}') f(\mathbf{p}') \quad , \quad \epsilon_{\mathbf{p}} = \frac{\hbar^2 p^2}{2m}$$

虚部は次のように与えられる。

$$\text{Im } \Pi^{\text{HF}}(\mathbf{q}, \omega) = - \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \text{Im } I(\mathbf{q}, \omega; \mathbf{p}) \left| A(\mathbf{q}, \omega; \mathbf{p}) \right|^2 \quad (2.4)$$

$$= \pi \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \{ (1 - f(\mathbf{p})) f(\mathbf{p} - \mathbf{q}) + f(\mathbf{p})(1 - f(\mathbf{p} - \mathbf{q})) \}$$

$$\times \delta(\omega - E(\mathbf{p}) + E(\mathbf{p} - \mathbf{q})) \left| A(\mathbf{q}, \omega; \mathbf{p}) \right|^2 \quad (2.5)$$

この近似は次の sum rule を満し

$$\int_0^\infty \omega \epsilon_2(\mathbf{q}, \omega) d\omega = \frac{\pi \omega^2}{2} p \quad (2.6)$$

self-energy とそれに対応する vertex part を取りこんでいるという意味で self-consistent approximation である。短距離相関には HF 近似に取りこまれる electron-hole ladder よりも次節で示す electron-electron ladder が大切である。

§ 3 短距離相関

(i) pair correlation function

電媒定数を用いて $g(\mathbf{r})$ を計算する場合 $g(\mathbf{r}) \geq 0$ (特に短距離相関には重要な要請である。) を保障するにはどのように計算すればよいかという問題はむずかしい。短距離相関には ($r \lesssim$ screening length) 物理的に考えても reasonable であるが screening の効果はあまり効かない。¹⁰⁾ 従来 $g(r)$ の計算に際して dielectric formulation にとらわれず

きた傾向がある。常磁性電子ガスの $g^{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ は次のように書ける。

$$g^{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{4}{n^2} \langle \Psi_0 | (\psi_\sigma(\mathbf{r}, t) \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}', t))^+ \psi_\sigma(\mathbf{r}, t) \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}', t) | \Psi_0 \rangle \quad (3.1)$$

n は電子密度, $\psi_\sigma(\mathbf{r}, t)$ は Heisenberg 表示の field operator。一般に Heisenberg 表示の operator の基底状態についての期待値を計算する場合 Green's function を用いた Feynman-Dyson 摂動論が広く使われる。すなわち time-independent な物理量の計算でも time-dependent formulation を使って計算をしているがこれは time-independent 摂動論の多くの項を一つの Feynman ダイアグラムにまとめてあつかう利点をもっている。¹¹⁾ 電子ガス系のように dynamical なプラズマ励起が存在しクーロンの long rangeness による発散を取り除くため screening の効果が必要な場合には dielectric formulation を使うことは natural である。しかしながらこの formulation では $g(\mathbf{r}) \geq 0$ を満たすことはむずかしく特に短距離相関をあつかう場合は screening の効果が重要でないことから波動関数を使って $g(\mathbf{r})$ を計算する方がよいと思われる。(この場合 screening の効果を取りこむのはめんどろである。) 波動関数を用いれば $g(\mathbf{r}) \geq 0$ はいつも保障されるが波動関数を近似するのにクーロンについて finite order で中止すれば r_s が大きくなるに従い $g(\mathbf{r})$ は大きくなりすぎたり発散するであろう。(特に $g^{\uparrow\downarrow}(0)$ についてそのような例を示すのは容易である。) 従って物理的に考えて短距離相関に重要と思われる効果をクーロンについて infinite order とりこむ必要がある。

interacting system の波動関数¹²⁾ は H_0 , E_0 をそれぞれ unperturbed system の Hamiltonian, ground state energy, H' を interaction term とすれば

$$|\Psi_0\rangle = \sum_{L,n} \left(\frac{1}{E_0 - H_0} H' \right)^n |\Phi_0\rangle \quad (3.2)$$

L は linked ダイアグラム, 中間状態として unperturbed ground state Φ_0 を取らないことを意味する。normalization を行なつて

$$g^{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{n^2} \frac{\langle \Psi_0 | [\psi_\sigma(\mathbf{r}) \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}')]^+ [\psi_\sigma(\mathbf{r}) \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}')] | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \quad (3.3)$$

ここで $\psi_\sigma(\mathbf{r})$ は Schrödinger 表示の field operator, normalization の項は粒子数 $N \rightarrow \infty$ に従って指数関数的に小さくなる。エネルギーの計算の場合と同様に connected

$$g^{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{n^2} \langle \phi_0 | \left[\psi_\sigma(\mathbf{r}) \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \sum_n \left(\frac{1}{E_0 - H_0} H' \right)^n \right] \left[\psi_\sigma(\mathbf{r}) \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \sum_n \left(\frac{1}{E_0 - H_0} H' \right)^n \right] | \phi_0 \rangle \right. \\ \left. \text{connected} \right. \quad (3.4)$$

となる。すなわち基底状態のエネルギー shift の計算にあらわれる各オーダーの connected ダイアグラムから任意のクーロン相互作用 $v_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ を取り除くと $g^{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ のダイアグラムが得られる。先に報告したように¹³⁾ electron-electron ladder ダイアグラムを考慮すれば式 (3.4) から $g^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ は

$$g^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{4}{n^2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} f(\mathbf{p}) f(\mathbf{p}') \left| 1 + \sum_{\mathbf{q}} \frac{(1-f(\mathbf{p}+\mathbf{q}))(1-f(\mathbf{p}'+\mathbf{q}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}} \cdot I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \right|^2 \quad (3.5)$$

ここで $I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q})$ は次の積分方程式の解である。

$$I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}) = v(\mathbf{q}) + \sum_{\mathbf{k}} v(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \frac{(1-f(\mathbf{p}+\mathbf{k}))(1-f(\mathbf{p}'+\mathbf{k}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}}} \cdot I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{k}) \quad (3.6)$$

この結果は $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \lesssim \text{screening length}$ については良いけれども $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \gg \text{screening length}$ の場合には screening の効果が重要になりそれを考慮しない式 (3.5) を用いてエネルギーを計算すれば発散する。(式 (3.5) の first order の項による。)

(ii) large momentum transfer interaction

RPA は金属電子密度ではその validity が保障されずその最も著しいあらわれの一つは pair correlation function の短距離の振舞である。Nozieres and Pins,¹⁴⁾ Hubbard¹⁾ らは small momentum transfer interaction では RPA, short range interaction では 2nd order exchange が direct term を半分相殺するように interpolate したが、先に報告¹³⁾ したように large momentum transfer interaction に寄与する過程は 2nd order term ばかりでなく electron-electron ladder ダイアグラム (exchange ダイアグラムを含めて) が特に金属電子密度では essential でありこれらが考慮されなかったこ

とが従来の (STLS理論以外の) 短距離相関の記述の失敗の原因である。

STLS理論では Hubbard factor $f(\mathbf{q})$ の \mathbf{q} の大きい極限での値 ($1 - f(\infty)$ はこの近似での structure factor $S^{\text{STLS}}(\mathbf{q})$ の漸近形の q^{-4} の係数に比例している。) と $g(r)$ の原点での値とその微分 (r_s についての) の和が次の関係を持つことが示されているが

$$\lim_{q \rightarrow \infty} f^{\text{STLS}}(\mathbf{q}) = 1 - g(0) - \frac{1}{2} n \frac{\partial}{\partial n} g(0) \quad (3.7)$$

これは STLS理論に固有のもので exact theory の性質ではない。

一般には structure factor $S(\mathbf{q}) = \frac{1}{n} \langle \rho_{\mathbf{q}} \rho_{-\mathbf{q}} \rangle$ の漸近的振舞と $g(\mathbf{r})$ の短距離振舞の関係は Fourier 変換とその性質から

$$g(\mathbf{r}) - 1 = \frac{1}{n} \sum_{\mathbf{q}} (S(\mathbf{q}) - 1) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \quad (3.8)$$

$S(\mathbf{q})$ は電子ガスでは \mathbf{q} の大きい場合次の漸近的形をもつことに注目すると

$$S(\mathbf{q}) = 1 - \frac{A(r_s)}{q^4} + \dots \quad (3.9)$$

$$\left. \frac{\partial g(\mathbf{r}, r_s)}{\partial r} \right|_{r=0} = \frac{3}{4} \pi A(r_s) \quad (3.10)$$

すなわち $g(r)$ の原点での微係数と $S(\mathbf{q})$ の漸近形 q^{-4} の係数の間には上のような exact な関係¹⁵⁾がある。(\mathbf{q} , r は p_F , p_F^{-1} で reduce としてある。) 従って r の小さい場合

$$g(r) = g(0) + \frac{3}{4} \pi A(r_s) r + \dots \quad (3.11)$$

となる。この linear な項は $g^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ によるもので $g^{\uparrow\uparrow}(\mathbf{r})$ の微係数は zero である。RPA, Hubbard ... など (i) ~ (v) までの近似では q^{-4} の係数は r_s について linear でありその結果、微係数は r_s と共に際限なく増加する。(実際そのような数値計算例が見られる。)

(vi) の Lundqvist 近似では平均的スペクトルを

$$\omega(\mathbf{q}) = \sqrt{\omega_{pl}^2 + Aq^2 + \epsilon_q^2}$$

としているが平方根中の q^2 の項は q の大きい所で cut しないと $g(0)$ 自身発散してしまう。

$g(0)$ と $g(r)$ の原点での微係数は一般的に直接にはむすびついていないと思われるが RPA 近似などに見られるように微係数が r_s に linear に際限なく増加することと $g(0)$ が

安原 洋

負の値をとることは関連がある。一般にどのようなダイアグラムが $S(\mathbf{q})$ の q^{-4} の漸近形に寄与するかという問はむずかしい。すでに述べたように electron-electron ladder は q^{-4} に寄与するがより一般的には electron-electron interaction (electron-hole, hole-hole でなく) を部分的に含むある種のダイアグラムは q^{-4} に寄与するということは出来る。いずれにせよ短距離相関の記述には, large momentum transfer process を r_s について higher order までとりこむことが不可欠であり物理的にもうなずける。screening length や self-energy cloud の大きさよりも短距離 ($p_F r \lesssim 1$) の電子の振舞に関して screening や self-energy の効果はあまり効果がないように思われる。従って次の節で行う interpolation では self-energy effect は考慮しない。

§4 電媒定数

1) Hubbard interpolation

図1. に示される ele-ele ladder ダイアグラムとその exchange process からの ground state energy shift への寄与を ΔE_{ladd} とすると次のように書ける。

$$\Delta E_{\text{ladd}} = \frac{1}{2n} \sum_{\mathbf{q}} v(\mathbf{q}) \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{p}' \\ \sigma, \sigma'}} \frac{f(\mathbf{p})(1-f(\mathbf{p}+\mathbf{q}))f(\mathbf{p}')(1-f(\mathbf{p}'+\mathbf{q}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}} \cdot \{ I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}) - v(\mathbf{q}) - \delta_{\sigma, \sigma'} I(\mathbf{p}, \mathbf{p}', -\mathbf{p} - \mathbf{p}' - \mathbf{q}) \} \quad (4.1)$$

$I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q})$ は式 (3.6) の解である。

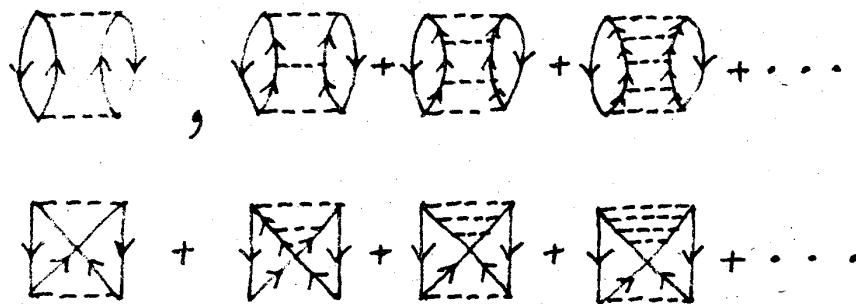


図1. ladder ダイアグラム

図1. の上段の第一番目のダイアグラムは周知のように発散するので除いてある。他の項は裸のクーロンでも発散しない。式(4.1)の右辺の{ }の中の最初の二項は direct process 第三項は exchange process である。 $I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; -\mathbf{p}-\mathbf{p}'-\mathbf{q})$ を lowest order $v(\mathbf{p}+\mathbf{p}'+\mathbf{q})$ で近似すれば 2nd order exchange を与える。

Hubbard 近似¹⁾の電媒定数はこれを用いてエネルギーを計算した場合プラズマを virtual に励起する small momentum transfer interaction と 2nd order direct and exchange terms を取り入れるように interpolate したもので次のように与えられる。

$$\epsilon_H(\mathbf{q}, \omega) = 1 + \frac{v(\mathbf{q}) \Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)}{1 - f(\mathbf{q}) v(\mathbf{q}) \Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)} \quad (4.2)$$

ここで $\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)$ は non-interacting system の polarizability で

$$\Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) = - \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \left\{ \frac{f(\mathbf{p})(1-f(\mathbf{p}+\mathbf{q}))}{\omega + i\delta + \epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}} - \frac{f(\mathbf{p}+\mathbf{q})(1-f(\mathbf{p}))}{\omega - i\delta + \epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}} \right\} \quad (4.3)$$

いわゆる Hubbard factor $f(\mathbf{q})$ は次のように定義される。

$$\begin{aligned} & \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{p}' \\ \sigma, \sigma'}} \frac{f(\mathbf{p})(1-f(\mathbf{p}+\mathbf{q}))f(\mathbf{p}')(1-f(\mathbf{p}'+\mathbf{q}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}} \cdot v(\mathbf{p}+\mathbf{p}'+\mathbf{q}) \delta_{\sigma, \sigma'} \\ & \equiv f(\mathbf{q}) v(\mathbf{q}) \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \text{Im} \{ \Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) \}^2 \end{aligned} \quad (4.4)$$

2nd order exchange ばかりでなく ele-ele ladder ダイアグラムを Hubbard 流に電媒定数の形にとりこむには次のように $\phi(\mathbf{q})$ を定義すれば良い。

$$\begin{aligned} & - \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{p}' \\ \sigma, \sigma'}} \frac{f(\mathbf{p})(1-f(\mathbf{p}+\mathbf{q}))f(\mathbf{p}')(1-f(\mathbf{p}'+\mathbf{q}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}}} \\ & \cdot \frac{1}{2} \frac{d}{de^2} \left[e^2 \{ I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}) - v(\mathbf{q}) - \delta_{\sigma, \sigma'}, I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; -\mathbf{p}-\mathbf{p}'-\mathbf{q}) \} \right] \end{aligned}$$

$$\equiv \phi(\mathbf{q}) \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \text{Im} \{ \Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega) \}^2 \quad (4.5)$$

この $\phi(\mathbf{q})$ を使えば拡張された Hubbard 流電媒定数は

$$\epsilon^{\text{GH}}(\mathbf{q}, \omega) = 1 + \frac{v(\mathbf{q}) \Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)}{1 - \phi(\mathbf{q}) \Pi^{(0)}(\mathbf{q}, \omega)} \quad (4.6)$$

となる。式(4.5)に e^2 の微分があらわれるのは $\epsilon^{\text{GH}}(\mathbf{q}, \omega)$ を使ってエネルギーを計算した場合図1. のダイアグラム系列が正しく取りこまれるようにするからである。式(4.5)の $\{ \}$ 中は $\mathbf{q} \rightarrow \infty$ の場合 $f(\mathbf{p})$, $f(\mathbf{p}')$ の制限があるから $\frac{1}{2} I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}) - v(\mathbf{q})$ に近づく。これは, Pauli principle のためである。

$\phi(\mathbf{q})$ の $q \rightarrow 0$ の limit は compressibility¹⁶⁾ と関連している。我々の取りこんだ direct ladder process は lowest order で

$$\sum_{\mathbf{k}} v(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \frac{(1-f(\mathbf{p}+\mathbf{k}))(1-f(\mathbf{p}'+\mathbf{k}))}{\epsilon_{\mathbf{p}} - \epsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{p}'} - \epsilon_{\mathbf{p}'+\mathbf{k}}} v(\mathbf{k}) \quad (4.7)$$

となりこの項に対応して式(4.5)で定義される $\phi^{(2D)}(\mathbf{q})$ は $\ln q$ で発散する。これは $\mathbf{q} \rightarrow 0$ で screening の効果が考慮されていないためである。従って $I(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q})$ の満す積分方程式の kernel に screening の効果を考慮する。すなわち

$$v(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \rightarrow \frac{4\pi e^2}{|\mathbf{q}-\mathbf{k}|^2 + k_s^2}$$

と置きかえれば良い。 k_s は compressibility の値を適切に与えるようにすれば良い。

ii) effective interaction $\phi(\mathbf{q})$

実際に $\epsilon^{\text{GH}}(\mathbf{q}, \omega)$ を使用するには具体的な $\phi(\mathbf{q})$ の形が必要である。 \mathbf{q} の大きい場合には積分方程式(3.6)を近似的に解いて \mathbf{q} の小さい場合には $\Pi^{\text{GH}}(q \rightarrow 0, 0)$ が Gell-Mann Bruckner¹⁷⁾ の correlation energy を微分して得られる compressibility を与えるように \mathbf{q} の大きい場合の振舞と \mathbf{q} の小さい場合のそれを interpolate する。 $q \gtrsim 2p_F$ では p ,

$p' \leq p_F$ であるから $I(0,0; \mathbf{q})$ がわかれば良い。 $I(0,0; \mathbf{q})$ は次の積分方程式を満す。

$$I(\mathbf{q}) = \frac{1}{q^2} + \lambda \int_1^\infty dk \frac{1}{qk} \ln \left| \frac{q+k}{q-k} \right| \cdot I(k) \quad (4.8)$$

$$\lambda = \frac{\alpha r_s}{\pi}, \quad \alpha = 0.52106$$

q, k は p_F , $I(q)$ は $v(p_F)$ で reduce されている。 kernel は \ln 発散するがこれは screening を考慮しないため次のように kernel を展開してその第一項を取れば実質的に screening の効果を取りこんだことになる上に iteration から解くことが出来る。

$$\begin{aligned} \frac{1}{qk} \ln \left| \frac{q+k}{q-k} \right| &\approx \frac{1}{q^2} + \frac{2}{3} \frac{k^2}{q^4} + \dots & \text{for } k < q \\ &\approx \frac{1}{k^2} + \frac{2}{3} \frac{q^2}{k^4} + \dots & \text{for } k > q \end{aligned}$$

解は

$$I(\mathbf{q}, \lambda) = \frac{1}{q^2} G(\lambda) F(\mathbf{q}, \lambda) \quad (4.9)$$

ここで $F(\mathbf{q}, \lambda)$, $G(\lambda)$ は次のように考えられる。

$$\begin{aligned} F(\mathbf{q}, \lambda) &= 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n! (n+2)!} \left(\frac{4\lambda}{q} \right)^n \\ &= 2 \left[\frac{2}{2^{3/2} \left(\frac{2\lambda}{q} \right)^{1/2}} \right]^2 \cdot I_2 \left[2^{3/2} \left(\frac{2\lambda}{q} \right)^{1/2} \right] \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned} G(\lambda) &= \frac{1}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n! (n+1)!} (4\lambda)^n} \\ &= \frac{2\lambda^{1/2}}{I_1[4\lambda^{1/2}]} \end{aligned} \quad (4.11)$$

$I_1(x)$, $I_2(x)$ は各々 1 次, 2 次の変形された Bessel function である。 $\Phi(q) = v(p_F)$

× $\tilde{\Phi}(q)$ として $\tilde{\Phi}(q)$ (q は p_F で reduce してある。) を定義すると q の大きい場合

$$\tilde{\Phi}_L(q) = \frac{1}{2q^2} \cdot \frac{1}{\lambda} \frac{d}{d\lambda} \left[\lambda^2 \left\{ 1 - \frac{1}{2} G(\lambda) F(q, \lambda) \right\} \right] \quad (4 \cdot 12)$$

一方 compressibility の値は¹⁶⁾

$$\frac{\kappa_0}{\kappa} = 1 - \lambda - (1 - \ln 2) \lambda^2 + \dots \quad (4 \cdot 13)$$

であるからこの値を再現するように $\tilde{\Phi}(q \rightarrow 0)$ を選ぶと

$$\tilde{\Phi}_s(q \rightarrow 0) = \frac{1 + (1 - \ln 2) \lambda}{4} \quad (4 \cdot 14)$$

interpolation はいろいろの方法があるが単純に次のように取る。

$$\tilde{\Phi}(q) = \frac{\tilde{\Phi}_s \cdot \tilde{\Phi}_L(q)}{\tilde{\Phi}_s + \tilde{\Phi}_L(q)} \quad (4 \cdot 15)$$

$\tilde{\Phi}(q, \lambda)$ は λ と q の関数として与えられるので数値計算に使用する場合には便利である。

$\tilde{\Phi}(q, \lambda)$ の $q \rightarrow \infty$ の極限は式 (4・10), (4・12) から

$$\lim_{q \rightarrow \infty} \tilde{\Phi}(q) = \frac{1}{2q^2} \cdot \frac{1}{\lambda} \frac{d}{d\lambda} \left[\lambda^2 \left\{ 1 - \frac{G(\lambda)}{2} \right\} \right] \quad (4 \cdot 16)$$

すなわち一般化された Hubbard factor $f(q)$ ($\tilde{\Phi}(q) = f(q) \frac{1}{q^2}$) は

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow \infty} f(q) = \frac{1}{2} \quad (4 \cdot 17)$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lim_{q \rightarrow \infty} f(q) = 1$$

という性質をもっている。従来の Hubbard factor は (STLS 理論を除く) λ によらず $f(\infty) = \frac{1}{2}$ となるがこれは高密度の場合のみ正しいのであって一般には λ の増加, すなわち金属電子密度からより低電子密度になるに従い 1 に近づく。この性質は $g(r)$ or $g^{\uparrow\downarrow}(r)$ の原点での微係数は $\lambda \cdot \{ f(q \rightarrow \infty, \lambda) - 1 \}$ に比例するので高密度極限での値 zero からはじめは λ に比例して増加しどこかで最大値をとりそれより低密度では次第に zero に近づくことを意味している。

このようにして得られた $\epsilon^{GH}(\mathbf{q}, \omega)$ は sum rule (式 (2・6)) を満し q の小さい場合

電子ガスの電媒定数については RPA, 大きい場合は金属電子密度での短距離相関に重要な ele-ele ladder をとりこんでおり $\omega=0$ として static screening として使用することも出来る。しかしながら ele-ele ladder が static polarization の短距離振舞に ($\Pi(q, 0)$ の q の大きい場合の q^{-6} および higher order の係数に) 効いて来るわけであるが $\epsilon^{GH}(\mathbf{q}, \omega)$ はエネルギーの計算に最も良く適応するように作られているので (Hubbard 近似の精神) static dielectric function として q の大きい場合に注目する場合には ele-ele ladder ダイアグラムの static polarization への寄与を計算した方が良いと思われる。

§ 5 討 論

vii) の STLS 理論は large momentum transfer interaction を higher order まで self-consistent に取りこんでいる。しかし彼らの数値計算は不正確である。(特に q の大きい所からの寄与をいかに取りあつかっている。) STLS 理論が quantum な摂動論的立場からどのような過程を取りこんでいるかという問は、はっきりしないが $\epsilon^{GH}(\mathbf{q}, \omega)$ とかなり関係があると思われる。

元来 STLS 理論は classical gas theory でその foundation が最近¹⁸⁾しらべられている。classical な電子ガスの場合 screening length よりも短距離での pair correlation function は exact に $e^{-\frac{1}{kT} \frac{e^2}{r}}$ のようにふるまう。¹⁹⁾ STLS の classical theory でもこの形を保障していない。quantum の場合 exclusion principle $g^{\uparrow\downarrow}(0) = 0$, 波動関数のひろがりなどの効果 $g^{\uparrow\downarrow}(0) \neq 0$ があるとしても STLS の主張するように短距離相関に三体相関効果が重要であるとは思えない。classical の場合の $e^{-\frac{1}{kT} \frac{e^2}{r}}$ の形には第3の粒子の存在は全く効いていない。我々が行なったように $g^{\uparrow\downarrow}(\mathbf{r})$ の短距離振舞の記述に裸のクーロン相互作用による ele-ele ladder だけ考慮することは中間状態についての exclusion principle の制限 (Fermi 球外に散乱する。これは実質的に screening の効果をおよぼす。) という形では第3の粒子の存在を配慮しているがかなり良く短距離相関を記述するものと思われる。最後に日常有益な討論をして下さる渡部三雄助教授に感謝いたします。

文 献

- 1) J. Hubbard, Proc. Roy. Soc., A243, 336(1958).
- 2) L. Kleinman, Phys. Rev., 172, 383(1968);

Phys. Rev. , 160, 585(1967) ;

P. R. Antoniewicz and L. Kleinman, Phys. Rev. , B2, 2828(1970).

3) D. Langreth, Phys. Rev. , 181, 753(1969).

4) D. J. W. Geldart and R. Taylor. , Can. J. Phys. , 48, 155(1970).

5) F. Toigo and T. O. Woodruff, Phys. Rev. , B2, 3958(1970) ; Phys. Rev. , B4, 4312(1971).

6) J. Lam, Phys. Rev. , B3, 1910(1971).

7) B. I. Lundqvist, Phys. kondens. materie. , 6, 206(1967).

8) A. W. Overhauser, Phys. Rev. , B5, 1888(1970).

9) P. Vashishta and K. S. Singwi, Phys. Rev. , B6, 875(1972).

10) D. J. W. Geldart, Can. Journ. Phys. , 45, 3139(1967).

11) A. L. Fetter and J. D. Walecka, Quantum theory of many-particle systems, McGraw-Hill, Inc. 1971.

12) J. Galdstone, Proc. Roy. Soc. (London), A239, 267(1957).

13) 物性研究 18 - 2, 55.

H. Yasuhara, Solid. State. Comm. , 11, 1481(1972).

14) P. Nozieres and D. Pines, Phys. Rev. , 109, 762(1958).

15) 広池, 福井, 物性研究 6 - 5, 187.

16) D. J. W. Geldart and S. H. Vosko, Can. Journ. Phys. , 44(1966).

17) M. Gell-Mann and K. A. Bruckner, Phys. Rev. , 106, 364(1957).

18) M. C. Abramo and M. P. Tosi, Nuovo, Cimento. , 10B, 21(1972).

19) K. F. Berggren, Phys. Rev. , A1, 1783(1970).